

TARTU ÜLIKOOL

LOODUS- JA TÄPPISTEADUSTE VALDKOND

Füüsika Instituut

Viktoria Sorokina

Vase pinnakareduste elektriväljast põhjustatud deformatsiooni uurimine
molekulaardünaamika meetodiga

Bakalaureusetöö (12 EAP)

Juhendajad: Simon Vigonski
Kristian Kuppert

Tartu 2017

Vase pinnakareduste elektriväljast põhjustatud deformatsiooni uurimine molekulaardünaamika meetodiga

Kiirendites, milles kasutatakse suuri elektrivälju on põhiliseks probleemiks vaakumläbilööride kõrge tõenäosus, mille vähendamiseks on esmalt vaja lõplikult aru saada läbilöögi tekke mehhanismist. Üheks välja pakutud läbilööride allikaks on pinna karedused. Käesolevas töös kasutatakse molekulaardünaamika meetodit, et uurida ühe kaldus pinnade defekti käitumist, kui tema otsale on rakendatud elektrostaatiline rõhk jälgendav jõud. Erilist tähelepanu pööratakse pinnade defekti sisse dislokatsiooni tekkeks ning pinnade defekti rebenemiseks vaja minevatele rõhu väärtustele ning nende sõltuvusele temperatuurist ning pinnade defekti võnkefaasist. Tulemuseks saadi elektrostaatilise jõu ja elektrivälja tugevuse väärtused, mis olid varasematest töödest lähtuvalt oodatud tulemustest mõnevõrra väiksemad.

Vask, vaakumläbilöörid, molekulaardünaamika, väljavõimendus

P250 Tahke aine: struktuur, termilised ja mehhaanilised omadused, kristallograafia, phase equilibria

Study of deformation of copper surface structures caused by the electric field using molecular dynamics method

The main problem accelerators that use strong electric fields face, is the high vacuum breakdown rate. To be able to lower the breakdown rate it is important to first understand the mechanism behind it. One of the proposed sources of vacuum breakdown are slip markings. In this work molecular dynamics method is used to study the behaviour of one such marking when an electrostatic force is applied to it. Attention will be given to the temperature and oscillation phase dependence of the force needed for dislocations to appear and markings to break. The values of the obtained electrostatic force and electric field strength were somewhat lesser than expected from past works.

Copper, vacuum breakdown, molecular dynamics, field enhancement

P250 Condensed matter: structure, thermal and mechanical properties, crystallography, phase equilibria

SISUKORD

1	LÜHENDITE SÕNASTIK	4
2	SISSEJUHATUS.....	5
3	TEOORIA	6
3.1.	Vaakumläbilöökide teke	6
3.2.	Dislokatsioonid	9
3.3.	Atomaarne mehaaniline pinge	9
3.4.	Sissejuhatus MD-sse	10
3.4.1.	Termostaadid	11
3.4.2.	MD ja reaalsuse vastavus. Suurte jõudude ja lühikeste aegade probleem.....	13
4	MEETOD	13
4.1	Võrekonstandi leidmine	13
4.2	Süsteemi ülesseadmine	14
4.3	Dislokatsiooni ja rebenemise jaoks kuluva jõu leidmine.....	16
5	TULEMUSED JA ANALÜÜS	18
5.1	Võrekonstant.....	18
5.2	Dislokatsioonide tekkeks ja rebenemiseks vajalik elektrivälja tugevus	18
5.2.1	Sõltuvus temperatuurist	19
5.2.2	Sõltuvus võnkumisest	20
5.3	Dislokatsioonide ning rebenemise koht	21
5.4	Atomaarne sisepinge.....	21
5.5	Ioniseeritud osakesed pinnal	22
6	KOKKUVÕTE.....	23
7	KASUTATUD KIRJANDUS	23

1 LÜHENDITE SÕNASTIK

CLIC – Praegu arendusjärgus olev kompaktne lineaarpõrguti (*Compact linear collider*).

PSM – ingl *persistent slip markings* – pinnapealne karedus, mis on tingitud pinna väsimuskahjustustest ning tekib samasse kohta tagasi isegi kui see maha lihvida. Otsetõlkes „säilivad libisemismärgistused”.

fcc – tahksentreeritud kuubiline võrestruktuur.

MD – Molekulaardünaamika. Arvutisimulatsiooni meetod. vt pt 3.4.

EAM – ingl *Embedded-Atom Method*. Molekulaardünaamikas metallide uurimisel kasutatav potentsiaali liik.

NH termostaat – Nose-Hooveri termostaat. vt pt 3.4.1.

2 SISSEJUHATUS

Kompaktne lineaarpõrguti CLIC on arendamisjärgus olev mitme TeV-ne lineaarne elektron-positron põrguti, millega plaanitakse uurida kuni 3 TeV energiatega põrkeid. Selleks, et saavutada seda energiataset, on vaja kiirendada osakesi elektriväljas tugevusega 100 MV/m-ni¹, kusjuures pinna lähedal võib see ulatuda² väärtuseni 230 MV/m.

Nii tugeva elektrivälja korral tõuseb esile vaakumläbilöökide probleem. Need on elektrilised läbilöögid, mille põhjustajaks on pinnalt aurustunud osakestest tekkinud plasma mis tekitab juhtiva kanali mööda mida saavad laengud liikuda ka vaakumis. Need läbilöögid kahjustavad kiirendi pinda ning nende tulemusel katkeb elektronkiir³. Seega on kiirendi stabiilse opereerimise jaoks vaja vähendada vaakumläbilöökide tekkesagedust. Selleks on aga omakorda vajalik välja selgitada nende tekke täpne mehhanism.

Aatomite aurustumiseks vajalike tingimuste tekke põhjused pole seni täpselt teada⁴. Selleks, et sellest paremini aru saada, on uuritud läbilöökide sageduse sõltuvust elektriväljast⁵, materjalist⁶, struktuuri geomeetriast⁷ ja veel paljudest parameetritest⁸. Üheks uuringu suunaks on materjali pinnalähedaste defektide mõju välja selgitamine.

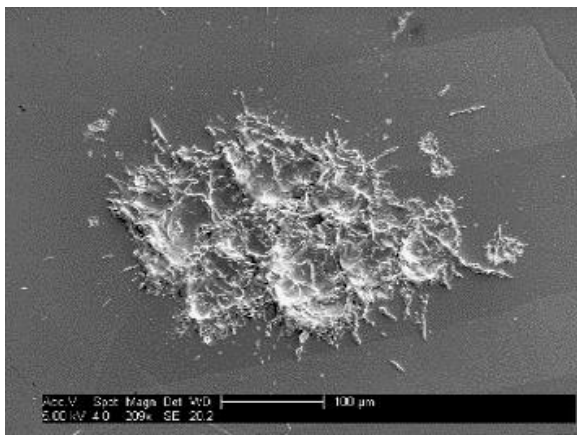
Enimlevinud hüpoteesi kohaselt loetakse läbilöögi tekke allikaks kiirendi katoodi pinnal olevaid karedaid struktuure, mille otsast algab elektronide emiteerumine. Neid karedusi nimetakse emitteriteks.

Laenguga pinnale, sealhulgas emitterile mõjub elektriväljas elektrostaatiline jõud⁹, mis tõmbab emitterit pinnast eemale. Eriti tugev on see jõud emitteri otsas, kus on tema geomeetria tõttu lokaalselt võimendatud elektriväli^{7,10}. Käesoleva töö eesmärk on uurida emitteri mehaanilist käitumist elektrostaatilist jõudu jälgendava välise jõu korral, et mõista millist mõju ja milliste elektrivälja tugevuste juures see emitterile avaldab. Uurimiseks kasutatakse molekulaardünaamika meetodit ning tarkvara LAMMPS¹¹.

3 TEOORIA

3.1. Vaakumläbilöökide teke

Elektriline läbilöök vaakumis on nähtus, mille protsessist on seni kindlaks tehtud vaid osa. On teada, et temperatuur pinna kareduste tippudes tõuseb drastiliselt elektrivälja mõjul. Kui tipud soojenevad piisavalt, läheb aine nendes üle tahkest olekust plasmaks. Plasmas hakkavad toimuma mikroskoopilised plahvatused, mille käigus potentsiaalibarjäärist suuremaid energiasid saanud elektronid lahkuvad pinnalt. Selle tulemusena plasmas olevad aatomid ioniseeruvad. Nii elektronide kui ka ioonide emissioonivoolusid on mõõdetud ning uuritud selle käitumist erinevate algtingimuste korral.^{12,13}



Joonis 1 „Kraatrid“ pinnal pärast läbilöögi toimumist.³

Kindel mehhanism, mis viib läbilöögi toimumiseni pole veel teada, kuna nende kestvus on liiga lühike nende eksperimentaalselt jälgimise jaoks. Eksperimentaalselt on vaadeldud pinna struktuuri vahetult enne ja pärast läbilöögi toimumist. Nagu näha jäävad peale läbilöögi toimumist pinnale vaid kraatrid, millest on raske järeldada, mis oli läbilöögi põhjustanud

Mõõtes emissioonivoolu ning kasutades Fowler-Nordheimi teooriat¹⁴, saab määrata, kas ja kui palju on elektrone emiteeriva tipu ümbruses elektriväli võimendatud. Katseliselt Fowler-Nordheimi teooria järgi leitud võimendusteguri väärtused ulatuvad kuni 100-ni^{7,15,16}. Kui elektriväli on lokaalselt võimendatud, võivad aatomid emitteri tipul ületada potentsiaalibarjääri ning lahkuda materjalist väiksema makroskoopilise elektrivälja korral.¹⁷

Elektrivälja poolt mõjub pinnale mehhaaniline pinge, mis avaldub valemist

$$P = \frac{\epsilon_0}{2} E^2, \quad (1)$$

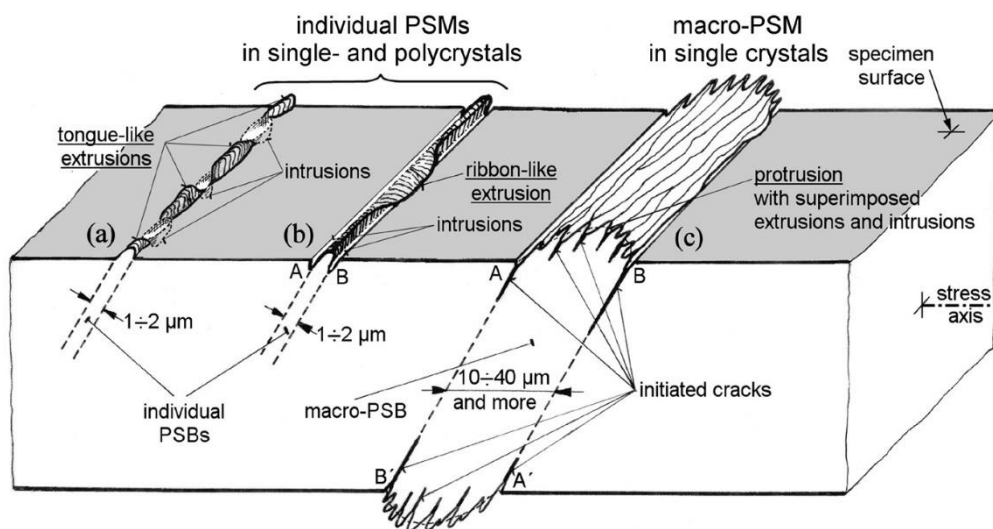
kus E on lokaalne elektriväli, ϵ_0 on vaakumi dielektriline läbitavus⁹. Selle pinge mõjul on emitter tõmmatud pinnast eemale ja selle tulemusel tekivad emitterisse dislokatsioonid ning see lõpuks rebeneb.

Eksperimentaalsed uuringud on näidanud, et perioodilise mehaanilise pinge all oleva materjali pinnale tekivad väsimuskahjustused (

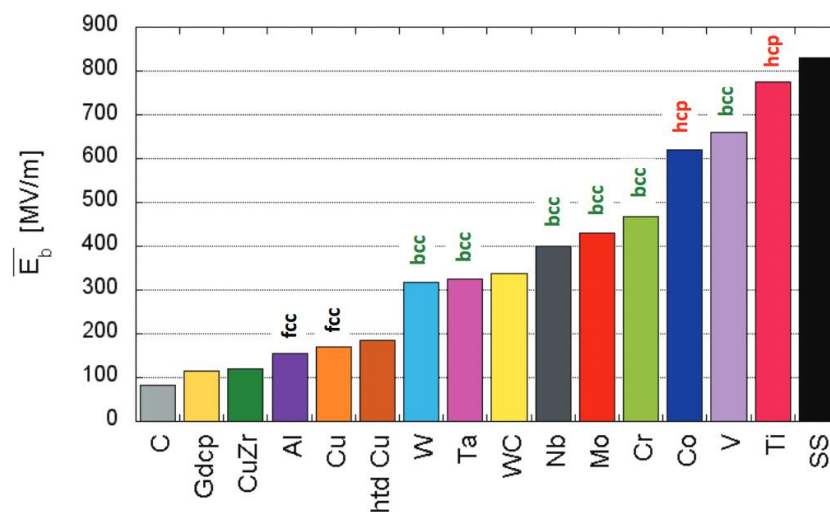
Joonis 2), mis on suunatud materjali libisemistasanditega paralleelselt ning on materjali sees olevate plastiliselt deformeerunud alade pinnapealsed jätkud. On samuti teada, et need pinnamoodustised on jäävad, st kui need ära lihvida ning seada materjal uuesti pinge alla, tekivad nad uuesti samasse kohta.^{18,19}

Varasemad simulatsioonid näidanud, et kui pinna läheduses on simuleeritud tühimik – aatomitest tühi ala – ning pinnale on rakendatud rõhk, mis jäljendab antud kontekstis elektrostaatilist rõhku, siis hakkavad pinna sisse tekkima dislokatsioonid ning pinna peale karedused^{20,21}. Seega on võimalik, et pinnale tekivad emitterid, mille geomeetria tõttu on nende otstes elektrivälja võimendus nii suur nagu seda on eksperimentaalselt jälgitud.

On uuritud ka vaakumläbilöökideks vajaliku makroskoopilise elektrivälja sõltuvust materjalist²⁰ ja on näha, et see on korrelatsioonis kristallstruktuuriga. Kõige väiksem taluvus näib olevat fcc struktuuriga materjalidel nagu vask, mis on kiirendites kasutatav materjal. Kuna vask on hästi elektrit juhtiv materjal, ei ole selle asendamine taluvama materjaliga mõistlik, sest see segaks otseselt kiirendi tööd.

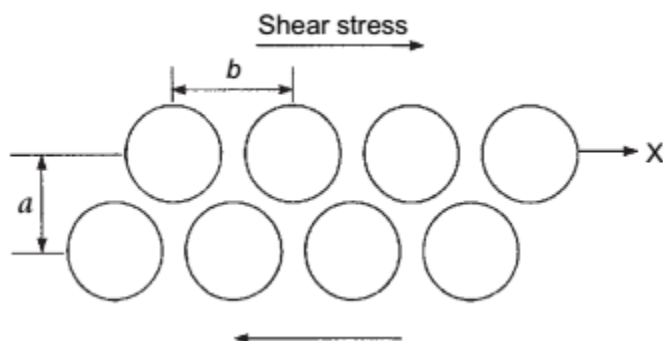


Joonis 2 Jooniselt on näha erinevate teravate pinnakareduste (ingl.k. *PSM*) teket uuritavale materjalile mõjuva pinge tõttu.¹⁸



Joonis 3 Keskmise läbilöögiks vajaliku makroskoopilise elektrivälja sõltuvus materjalist. Materjali taluvus on korrelatsioonis materjali kristallstruktuuriga.⁶

3.2. Dislokatsioonid



Joonis 4 Diskolatsiooni lihtsustatud mudel.¹³

Kõige tavalisem plastiliste deformatsioonide kuju kristallvõre on libisemine. Seda võib ette kujutada kui aatomvõre kihtide libisemist üle üksteise nn libisemistasandites. Selle jaoks, et libisemine tekkiks, on vaja iseloomulikku nihkepinget, mis on oluliselt madaldatud dislokatsioonide olemasoluga.^{22,23}

Enamus dislokatsioone üksikkristallides saavad oma alguse pinna peal.

Dislokatsiooni jooned saavad lõppeda ainult pinna peal või kristalliidi piirpinnal, kuid mitte kunagi kristalli sees. Seega dislokatsioonid peavad kas tekitama kinniseid silmuseid või hargnema teisteks dislokatsioonideks.²²

Fcc kristallides võib dislokatsioon jaguneda kaheks: eelnevaks ja järgnevaks osaliseks dislokatsiooniks, ning nende vahele tekib pakkedefekt. See on planaarne defekt, mille tulemusel korrapärane pakkejärjestus on katkestatud ning pakkestruktuur võib lokaalselt muutuda. Seda on aga kerge visualiseerida, mis võimaldab jälgida dislokatsioonide teket ja muutumist simulatsiooni jooksul.²³

3.3. Atomaarne mehaaniline pinge

Atomaarset mehaanilist pinget neutraalsete aatomite vahel saab kirjeldada valemiga

$$\sigma_{ij} = -\frac{1}{V} \left(m v_i v_j + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_p} r_{n,i} F_{n,j} \right) \quad (2)$$

kus V on atomaarne ruumala, m on aatomi mass, v on aatomi kiirus, summa on üle naaberaatomite, r on naaberaatomi kaugus ning F naaberaatomi ning antud aatomi vastastikune jõud.^{24,25}

LAMMPS arvutab vaid suuruse, mis on valemi (2) sulgude sees ning selle dimensiooniks on rõhk*ruumala. Selleks, et leida mehaaniline pinge aatomi kohta, on saadud suurust vaja jagada aatomi ruumalaga. Selle jaoks on aga vajalik hinnata aatomi ruumala, mis ei ole hästi defineeritud.

Kõikide aatomite ligikaudseks ruumalaks on võetud vase aatomi ruumala suure koguse korral. Selleks on $1,182 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$ ²⁶.

Saadud pingetensor on sümmeetriline tensor. Selleks, et seda oleks parem visualiseerida, teisendati see skalaarseks invariandiks – arvutati Von Mises’ stress, mida kasutatakse materjali plastilise deformatsiooni kirjeldamisel. Selle saab kätte valemist²⁷

$$\sigma_{vm} = \frac{1}{4} \sqrt{(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2 + 6(\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{31}^2)}. \quad (3)$$

Atomaarse pinge suurus sobib hästi süsteemi siseste pingete kvalitatiivseks hindamiseks.

3.4. Sissejuhatuse MD-sse

Molekulaardünaamika (MD) on arvutisimulatsioonimeetod, mis käsitleb aatomeid kui punktmasse, mille omavahelisi interaktsioone kirjeldavad potentsiaalifunktsioonid.

Potentsiaalifunktsioonid saadakse kasutades nii eksperimentaalseid tulemusi kui ka kvantmehhaanilisi simulatsioonimeetodeid²⁸. Vaatamata oma lihtsale olemusele, võib hea potentsiaali valiku korral saavutada väga häid (reaalsusega kokkulangevaid) tulemusi.

Metallide puhul kasutatakse tihti EAM potentsiaali. See kirjeldab i-nda aatomi koguenergiat kui

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}), \quad (4)$$

kus F_α on energia kui funktsioon atomistlikust elektrontihedusest ρ , ϕ on aatomi interaktsioonienergia teiste aatomitega, mis sõltub nende vahekaugusest ning α ja β on aatomite i ja j osakeste tüübid. Mõlemad summad on üle vaadeldava aatomi naabrite, mis on temast potentsiaali äralõikepiirist lähemal.²⁹

Äralõikepiir on kaugus, millest suurema vahekaugusega aatomite vastastikuse interaktsiooniga enam ei arvestata, kuna seda saab lugeda tühiselt väikeseks.³⁰

Kui aatomi potentsiaal on teada, saab arvutada aatomi jõu, mis on võrdne potentsiaali negatiivse gradiendiga ning sealt edasi aatomi liikumisvõrrandi. Nüüd saab iga määratud ajasammu tagant arvutada aatomite trajektoori, võttes arvesse nii liikumisvõrrandid, aatomi esialgsed kiirused kui ka talle mõjuvad välised jõud.³⁰ Ajasamm peab olema valitud selliselt, et see oleks palju väiksem toimuvate protsesside kestvusest, kuid piisavalt suur, et simulatsioon võtaks võimalikult vähe aega.

MD meetodiga saab simuleerida kuni 10 miljonist aatomilist koosnevate süsteemide ajalist käiku kuni 1 μ s jooksul. Samas võimaldab süsteemi perioodilisus tekitada ka suuremaid (küll aga mingi kauguse tagant korduvaid) süsteeme. Piiravaks tingimuseks on see, et süsteemi laius perioodilisuse suunas peab olema suurem kui aatomite potentsiaali äralõikepiir, et aatomid ei mõjutaks iseennast.

Kõigi kolme koordinaadi perioodilisuse korral on tegemist lõpmatu materjali koguga, kahe koordinaadi perioodilisuse korral lõpmatu pinnaga. Viimast on kasutatud selle töö simulatsioonides.

3.4.1. Termostaadid

Tähtis osa antud simulatsioonist on Nose-Hooveri (NH) termostaat, mida kasutatakse süsteemi temperatuuri kontrollimiseks.

Selle põhimõte seisneb selles, et tavalisele Hamiltoniaanile on lisatud üks fiktiivne osake, mida võib nimetada ajaskaleerimise muutujaks. Selle Hamiltoniaani kuju on

$$H = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\tilde{\mathbf{p}}^\alpha \cdot \tilde{\mathbf{p}}^\alpha}{2m^\alpha Q^2} + \frac{P^2}{2M} + 3Nk_B T \ln Q + \Phi(\mathbf{q}), \quad (5)$$

kus Q , P ja M on fiktiivse osakese parameetrid, mille roll on sarnane osakese asukoha, impulsi ja massiga, kuigi nende ühikud on teised. Muutuja $\tilde{\mathbf{p}}$ on defineeritud kui $Q\mathbf{p}^\alpha$ ehk fiktiivse osakese „asukoha“ ja osakese α impulsi korrutis^{30,31}.

Rakendades sellele Hamiltoniaanile Hamiltoni valemid ning tehes asenduse ajalisele muutujale $dt = Qdt_{uus}$, saame peale lihtsaid matemaatilisi asendusi järgmised kaks valemit:

$$m^\alpha \ddot{\mathbf{q}}^\alpha = \mathbf{f}^\alpha - \gamma m^\alpha \dot{\mathbf{q}}^\alpha, \quad (6)$$

$$\dot{\gamma} = \frac{1}{M} \left(\sum_{\alpha=1}^N \frac{\tilde{\mathbf{p}}^\alpha \cdot \tilde{\mathbf{p}}^\alpha}{m^\alpha} - 3Nk_B T \right). \quad (7)$$

Nagu näha, on teise valemi sulgude sees hetkelise ja soovitud temperatuuride vahe, millest sõltub γ muutumine ja seega ka süsteemi osakeste kiirused. Näiteks kui hetkeline temperatuur on soovitavast lõpptemperatuurist suurem, γ suureneb ning osakeste kiirused aeglustuvad, viies süsteemi kogutemperatuuri madalamaks.³⁰

LAMMPS võtab NH termostaadi jooksutamisel vabaks parameetriks ajalist parameetrit τ , mis on defineeritud kui²⁵

$$\tau = \sqrt{\frac{M}{3Nk_B T}}. \quad (8)$$

Seda võib vaadelda kui karakterset aega, mille jooksul süsteemi temperatuur relakseerub soovitud väärtuseni. Selle valikust sõltub, kui kiiresti süsteem soojeneb vajaliku temperatuurini ning selleni jõudes tasakaalustub. Kui τ on väike, kulub süsteemil rohkem aega, et jõuda vajaliku temperatuurini;

kui τ on suur, on fiktiivse osakese inerts liiga suur ning temperatuuri väärtused võivad jääda kauemaks võnkuma vajaliku väärtuse ümber.³⁰

Kui NH termostaadi korral muutub temperatuuri muutumisel süsteemi rõhk, kuid simulatsioonikasti ruumala jääb samaks, siis selle variatsioon, Nose-Pointcare'i termostaat, võimaldab hoida süsteemi rõhku konstantsena muutes kasti suurust. Käesolevas töös on kasutatud mõlemat.

3.4.2. MD ja reaalsuse vastavus. Suurte jõudude ja lühikeste aegade probleem

Kuna simulatsioonides vaadeldakse lühikeseid ajavahemikke, seadistati jõud ja jõu suurendamise kiirus kõrgemaks, kui nad reaalsuses on. Sellegi poolest võib väita, et selliste seadistustega saadud tulemused on reaalsusega kooskõlas. Nimelt on näidatud^{32,33}, et dislokatsiooni tekkeks vajaliku jõu väärtus kasvab struktuuri vähendamisel. Sama toimub ka jõu gradiendi suurendamisel. Seega on dislokatsiooni tekke tõenäosuse säilitamiseks vajalik tõsta ka jõudu ennast.

4 MEETOD

4.1 Võrekonstandi leidmine

Simulatsiooni ülesseadmiseks on vaja määrata uuritava aine võrekonstant. Temperatuuri tõstmisega kaasneb metallides soojuspaisumine, mis tähendab, et materjali võrekonstant ei ole temperatuuri suhtes konstantne. Seega soojendades süsteemi konstantse kasti ruumala ning madalale temperatuurile vastava võrekonstandi väärtuse juures, võib süsteemi siserõhk kasvada väga suureks. Sellise olukorra vältimiseks tuleb esmalt leida vase võrekonstant vajaliku temperatuuri jaoks, ning kasutada seda väärtust edaspidistes simulatsioonides.

Kindlale temperatuurile vastavat võrekonstanti saab leida luues perioodilise fcc võre orientatsiooniga $x(100)$, $y(010)$, $z(001)$ ning soojendades seda üles vajaliku temperatuurini Nose-Hooveri termostaadiga ja jälgides kasti laiust. Kasti laius jagatud ühikrakkude arvuga samas suunas annab keskmise võrekonstandi väärtuse. Aja möödudes saavutab süsteem tasakaaluoleku, kus

võrekonstant antud temperatuuri juures enam ei muutu. See ongi otsitav võrekonstant. Simulatsiooni alustamisel kasutati vase võrekonstandi väärtust 0 K juures ($3,597 \text{ \AA}$)³⁴.

Et teha kindlaks, et sellise meetodiga saadud võrekonstant ei sõltu kasti suurusel, korraldati katsed erinevate suuruselga kastidega.

4.2 Süsteemi ülesseadmine

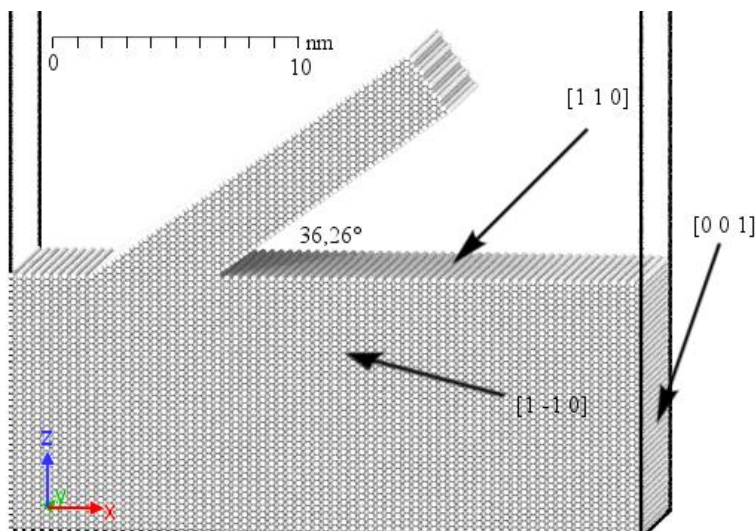
Jälgendamaks vase struktuuri, oli uuritava struktuuri võre orientatsioon $x(0\ 0\ 1)$ $y(1\ -1\ 0)$ ja $z(1\ 1\ 0)$. Kuna dislokatsioonid tekivad libisemistasanditel, saab välja arvutada, mis nurga all pinna suhtes peaks emitter kaldu olema. Kui on teada, et pinna orientatsioon on $(1\ 1\ 0)$ ning ühe libisemistasandi siht on $(1\ 1\ 1)$ siis saab arvutada nende kahe normaaliga kirjeldatava pinna vahelise nurga, milleks osutub 35.26° . Seda saab kontrollida tekitades uuritava orientatsiooniga lõpmatult laia süsteemi ning venitades seda, kuni selle sisse tekib dislokatsioon ning mõõtes selle dislokatsiooni nurka pinna suhtes.

Järgmiseks tekitati süsteem, mis koosnes lõpmatult laiast (perioodilisest x - ja y -suunas), eespool mainitud orientatsiooniga pinnast ning pinnaga 35.26° nurga all olevast väljaulatuvast, emitterit jälgendavast plaadist. See plaat, nagu ka pind, oli lõpmatult lai, kuid lõpliku pikkuse ning paksusega. Nii pikkus kui ka paksus valiti selliselt, et oleksid täidetud 3 põhinõuet:

1. Süsteem oleks piisavalt väike, et simulatsioonide jooksutamiseks kuluv aeg ei oleks liigselt pikk
2. Emitter oleks piisavalt suur, et selle võnkumise mõju ei oleks primaarne dislokatsiooni ning rebenemise hetkede mõjutaja.
3. Emitteri pikkuse ja paksuse suhe oleks piisavalt väike, et emitter ei kukkuks kokku pinnapingete ning võnkumiste tõttu.

Optimaalne emitteri suurus leiti katsetusmeetodil. Lõplikus seadistuses oli pinna suurus 25x10x10 nm ning emitteri pikkus 13 nm ja paksus 2,5 nm.

Pinna alumised kolm aatomite kihti olid fikseeritud kogu simulatsiooni kestel, et simuleerida lõpmatut materjali ulatust ja võimaldada materjali sees mehaaniliste pingete teket.



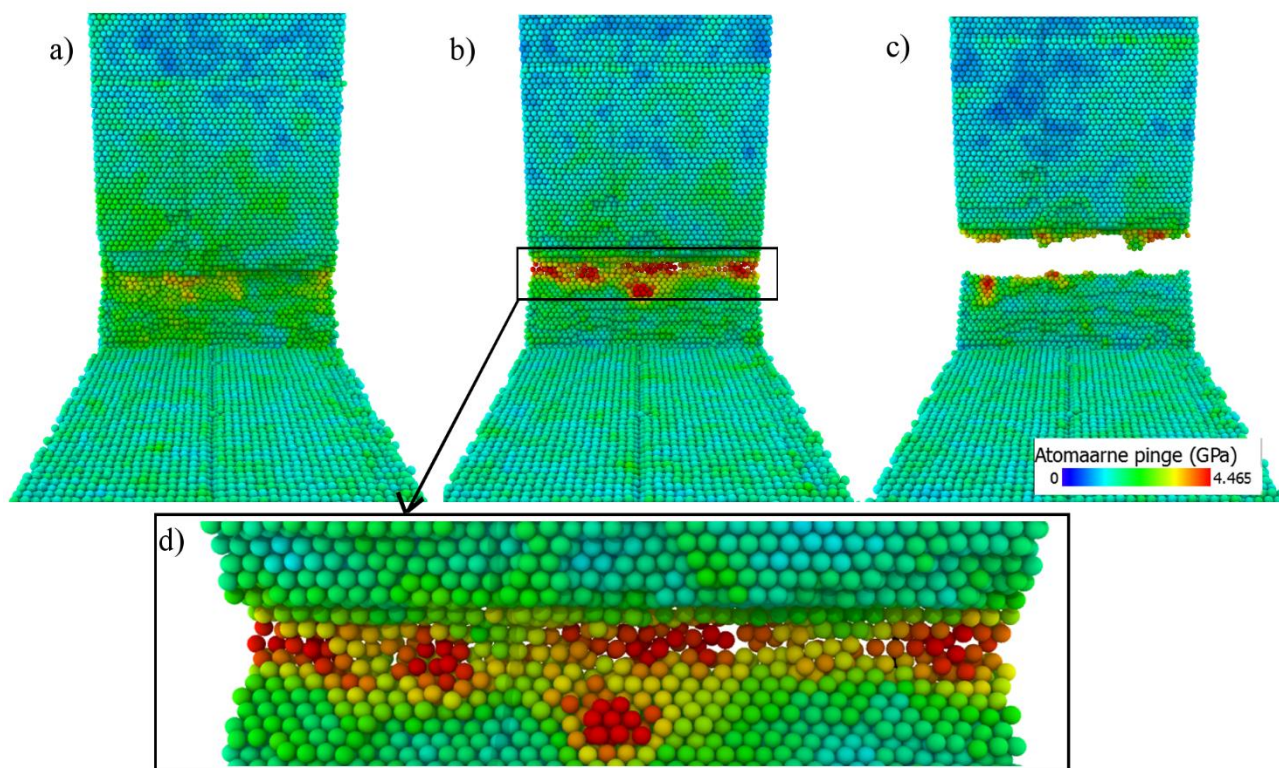
Joonis 5 Süsteemi skeem. Süsteem on perioodiline x ja y suunas.

Kuna vastloodud süsteem ei pruugi olla oma energia miinimumi seisundis, kõigepealt minimiseeriti süsteemi energia kasutades LAMPPS-i käsku *minimize*. Seejärel soojendati süsteemi 10 K-lt vajaliku temperatuurini 0,4 ns jooksul NH termostaadiga ning jäetud konstantse temperatuuri juures tasakaalustuma 0,1 ns-ks. Et vähendada süsteemi temperatuuri ja rõhu võnkumist, kasutati LAMMPS-i NH termostaadi funktsiooni lisaparametrit *drag*, mis summutas neid, moonutades vähesel määral NH võrrandeid.

Peale süsteemi tasakaalustamist rakendati emitteri tipule z-suunas mõjuv jõud, mis tõmbaks emitterit tipust üles. Tipu suurus valiti selliselt, et oleks võimalik mõõta selle aluse pindala, kuid et see oleks piisavalt peenike, et edaspidi arvutatud tulemused vastaksid reaalsusele nii täpselt kui võimalik.

Kogu simulatsiooni käigu tulemuste jälgimiseks kasutati tarkvara Ovito³⁵. Süsteemi olek oli väljastatud eraldi failidesse iga 1000 ajasammu ehk 2 ps tagant.

4.3 Dislokatsiooni ja rebenemise jaoks kuluva jõu leidmine



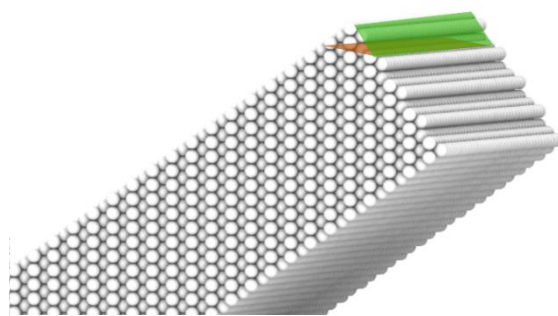
Joonis 6 Emitteri olek, mis võeti rebenemise hetkeks (b,d) ning olekud 8 ps enne (a) ja pärast (c) rebenemist. Pilt on värvitud atomaarse pinge väärtuste järgi.

Selleks, et teha kindlaks, mis jõu juures uuritavad protsessid toimuvad, suurendati otsikule rakendatavat jõudu konstantse kiirusega terve simulatsiooni vältel. Jõu suurenemise kiirus valiti selliselt, et see oleks nii väike kui võimalik, kuid viiks emitteri rebenemiseni vähem kui 2 miljoni ajasammu jooksul.

Simulatsioonide vältel tõsteti jõudu 0 eV/Å-lt 0.04 eV/Å-le 4 ns jooksul ehk jõu suurenemise kiiruseks oli 0.01 eV/Åns. Seega saab antud hetkel igale aatomile mõjuva jõu leida määrates dislokatsiooni tekke ja rebenemise ajahetke ning korrutades omavahel rebenemise aja (nanosekundites) 0,01-ga.

Rõhu saamiseks tuleb saadud suurus jagada pinna ristlõikega, millele seda jõudu rakendatakse ja korrutama aatomite arvuga, millele see jõud mõjub.

Kasutatava pindala pinnaks oli simulatiooni alguses jõu suunaga risti olev pind, mis eraldab jõu poolt mõjutatud aatomeid nendest aatomitest, mis ei ole jõu poolt otseselt mõjutatud (Joonis 7). See küll pole täpselt risti jõu suunaga ning jõu poolt mõjutatud ala pole ideaalne ühekihiline plaat, mille puhul ülaltoodud meetod oleks täpsem, kuid uurides selle pinna pindala ning emitteri otsa pindala on võimalik välja arvutada, et nende erinevus ei ületa 10%, ning seega sobib hästi tulemuste kvalitatiivseks hindamiseks.



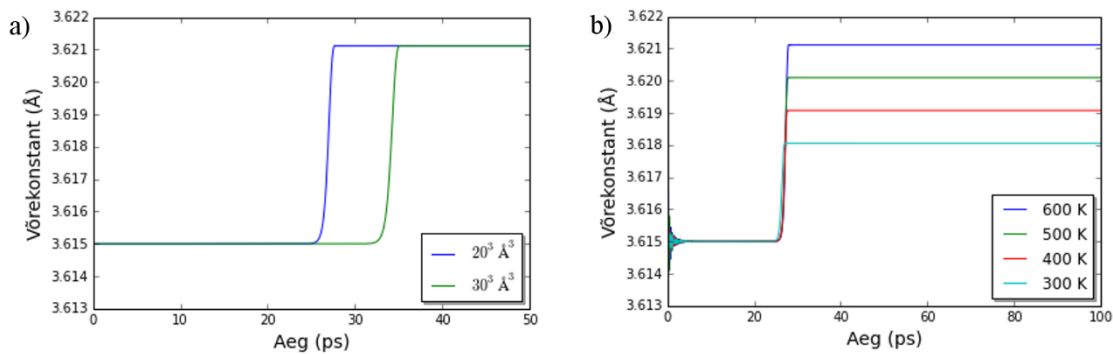
Joonis 7 Emitteri osa, mis on eraldatud joonisel oranži värvi pinnaga on simulatsioonides otseselt jõu mõju all. Oranži värvi pind on ka see, mille pindala on rõhu arvutamisel kasutatud. Roheliseks on joonisel värvitud pind, mida peaks kasutama arvutustes kui emitter on pinnaga risti asendis. Nende kahe pinna pindalad erinevad 10% ulatuses.

Teades elektrostaatilise rõhu sõltuvust lokaalse elektrivälja tugevusest (valem 1) saab arvutada välja, millise elektrivälja tugevuse korral tekivad struktuuri dislokatsioonid ning millal see rebeneb. Võrreldes neid tulemusi reaalsete suurustega, saab teha kindlaks, kas selline protsess oleks üldse võimalik.

Nii rebenemise kui ka dislokatsiooni ajahetke saaks teoreetiliselt määrata 2 ps täpsusega, kuid kuna mõlemad protsessid toimusid pikema aja vältel (Joonis 6), on tegelik määramatus siiski suurem – rebenemisel umbes 10 ps, dislokatsiooni tekkel 20 ps. See määramatus on aga palju väiksem kui tulemuste hälve, ning seega võib väita, et üksikute simulatsioonide rebenemise ning dislokatsiooni tekke ajahetked on määratavad väga hea täpsusega.

5 TULEMUSED JA ANALÜÜS

5.1 Võrekonstant



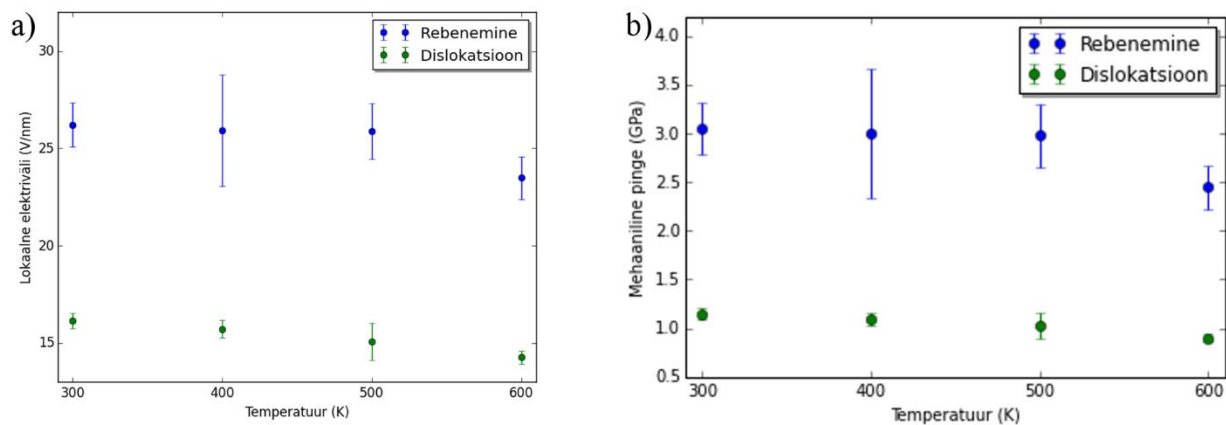
Joonis 8 Võre konstandi muutus simulatsiooni aja jooksul kui (a) 20^3 Å^3 ning 30^3 Å^3 suurused süsteemid soojendati 600 Kelvinini (b) 20^3 Å^3 süsteem soojendati temperatuurideni 300 Kelvinist 600 Kelvinini.

On näha, et temperatuuri kasvades kasvab ka võrekonstant, nagu teooria põhjal eeldada võis. Kuna simulatsioonide lõpus võrekonstandi väärtus enam ei muutu, võib eeldada, et süsteem saavutas oma tasakaaluoleku ning saadud võrekonstandi väärtused vastavad reaalsusele. tuuri kasvades ka võrekonstant. Kuna simulatsioonide lõpus võrekonstandi väärtus enam ei muutu, võib eeldada, et süsteem saavutas oma tasakaaluoleku ning saadud võrekonstandi väärtused vastavad reaalsusele. tuuri kasvades ka võrekonstant. Kuna simulatsioonide lõpus võrekonstandi väärtus enam ei muutu, võib eeldada, et süsteem saavutas oma tasakaaluoleku ning saadud võrekonstandi väärtused vastavad reaalsusele. tuuri kasvades ka võrekonstant. Kuna simulatsioonide lõpus võrekonstandi väärtus enam ei muutu, võib eeldada, et süsteem saavutas oma tasakaaluoleku ning saadud võrekonstandi väärtused vastavad reaalsusele.

5.2 Dislokatsioonide tekkeks ja rebenemiseks vajalik elektrivälja tugevus

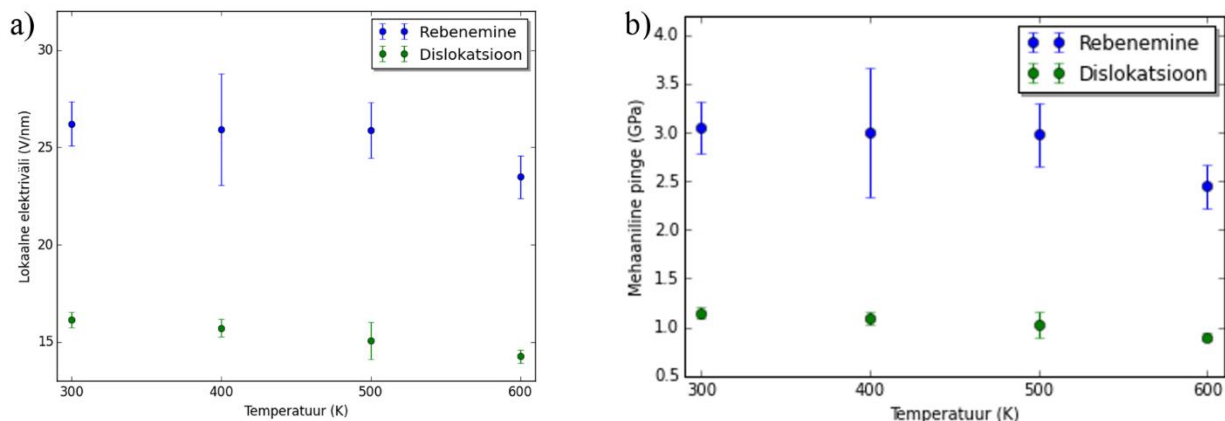
Analüüsis on kasutatud temperatuuride 300 K, 400 K, 500 K ja 600 K juures tehtud simulatsioonide tulemusi. Iga temperatuuri korral korralti katset 10 korda varieerides juhuslikku arvu, mille abil genereeritakse aatomite esialgne kiiruste jaotus.

5.2.1 Sõltuvus temperatuurist



Joonis 9 on näha iga temperatuuri juures sooritatud kümne korduskatse keskmised tulemused nende standardhälvetega. Nii dislokatsiooni tekkeks kui ka emitteri rebenemiseks vajaliku lokaalse elektrivälja tugevuse ning temperatuuri vahel näib olevat nõrk negatiivne seos. Eeldades lineaarset sõltuvust, saadi lineaarse regressiooniga elektrivälja temperatuurist sõltuvuse graafikul dislokatsioonide tekkel tõusuks $-6(2) \cdot 10^{-3}$ V/nm*K ning rebenemisel $-9(5) \cdot 10^{-3}$ V/nm*K. Seega saadud tulemuste mõõtemääramatuste piires ei ole korrelatsioon null.

Rebenemiseks vajalik lokaalne elektrivälja jäi kõigi katsete korral 20-30 V/nm vahele ehk otsikule mõjuv rõhk oli 2-3 GPa. Dislokatsioonid hakkasid tekkima juba 1 GPa juures. Need väärtused on mõnevõrra väiksemad võrreldes teiste sarnaste emitterite uuringutega^{4,6}. Üks võimalik põhjus, miks pinged nii madalad on, on emitteri võnkumine.



Joonis 9 Keskmise dislokatsiooni tekkeks ning emitter rebenemiseks vajaliku elektrivälja tugevuse (a) ning mehaanilise pinge (b) sõltuvus temperatuurist.

5.2.2 Sõltuvus võnkumisest

Nii erinevatel temperatuuridel kui ka erineva süsteemi suuruse korral võnkus emitter märgatavalt terve simulatsiooni jooksul. See võnkumine võib olla tingitud aatomite juhuslikust impulssist. Nii väikeste emitterite puhul on nende liikuma panemiseks vaja ülimalt väikest jõudu.

Simulatsioonidest oli näha, et nii dislokatsioon kui ka rebenemine tekivad alati siis, kui emitter liigub parajasti pinnast eemale. Emitter sooritab ühe võnke 80-90 ps jooksul. Grupeerides dislokatsiooni tekke ajahetked omavahel väärtuste sarnasuse järgi, on nende gruppide keskmised väärtused samuti lähedased emitteri võnkeperioodile.

Selle nähtuse põhjenduseks võib olla see, et otsikule rakendatud välise jõu ning võnkumisest tingitud impulsi koosmõjul saab emitter küllaldase energia, et tekiks dislokatsioon. Igal ajahetkel võib jaotada emitterit üles tõmbava jõu kaheks komponendiks, millest üks on suunatud paralleelselt emitteri libisemistasandiga ning seega panustab dislokatsiooni tekkesse. Kui emitter liigub parajasti pinnast eemale, lisandub sellele jõu komponendile sellega samasuunaline emitteri võnkumisest tingitud jõud ning dislokatsiooni tekkimine on kõige rohkem soodustatud.

Kuna emitter ei ole võnkumisel sirge, vaid paindus, oleks tarvis sellest mehhanismist paremini aru saamiseks tulevikus läbi viia põhjalik analüüs kõikidest jõukomponentidest igal võnkumise faasil.

5.3 Dislokatsioonide ning rebenemise koht

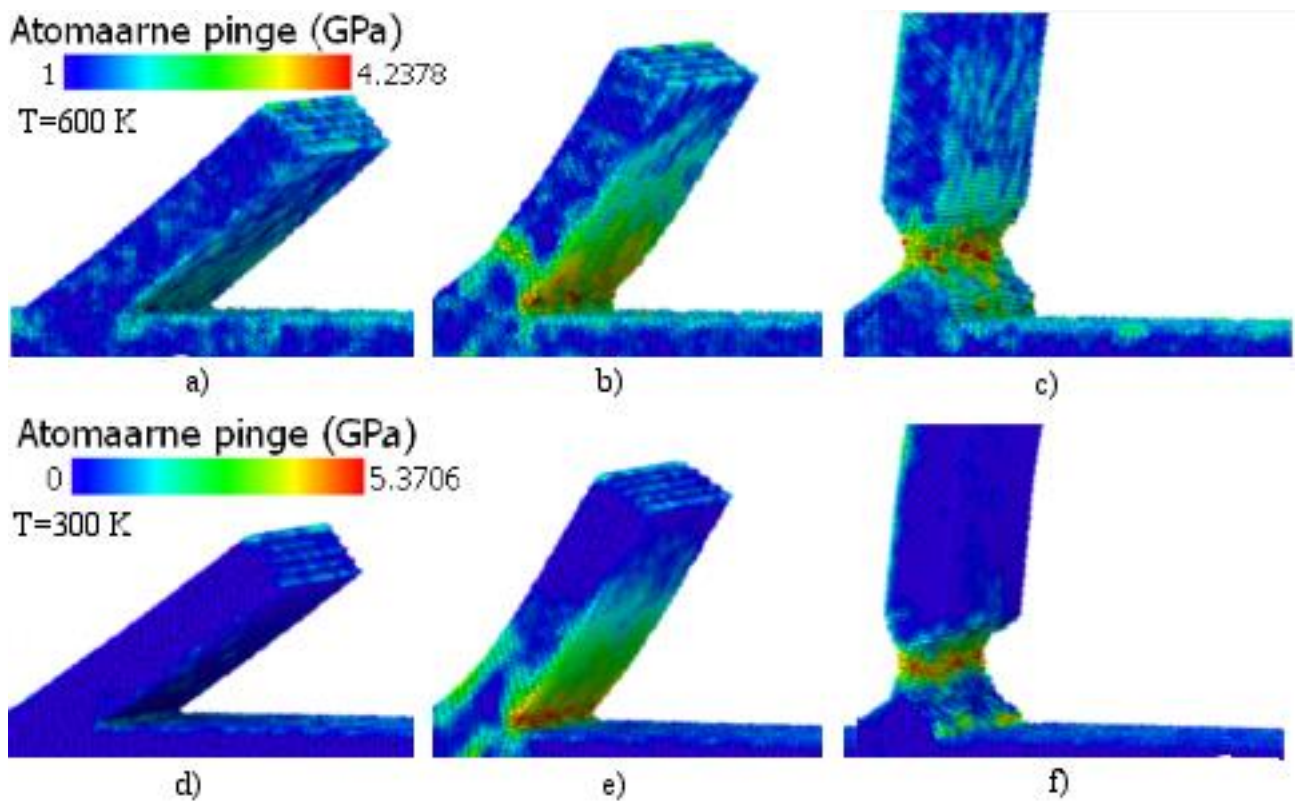
Vaatamata sellele, et jõud mõjus emitterile ainult tema ülemisest otsast, tekib rebenemine emitteri tüve lähedal. Simulatsioonidest oli näha, et tüve läheduses on sisepinge kõige suurem. Selle põhjuseks on emitteri suur paine kohas, kus toimub üleminek võnkuvalt peenemalt emitteri osalt paksemale suhteliselt staatilisele emitteri põhjale. Kuna pinna kulumine on tekitatud võnkumistega, näitab see veel kord, et emitteri võnkumine annab suure panuse dislokatsiooni tekkesse.

5.4 Atomaarne sisepinge

Dislokatsiooni tekkimiseks vajalik mehaaniline pinge kahaneb temperatuuri kasvades. Joonis 10 on näha atomaarse pinge jaotus vahetult enne jõu rakendamist, dislokatsiooni tekke hetkel ning vahetult enne emitteri rebenemist 300 ja 600 K juures. Pinge on keskmistatud nii ajas kui üle naabrite.

Vaadates samadel hetkedel kõigi simulatsiooni tulemusi, oli ilmne, et kõrgemal temperatuuril tekivad dislokatsioonid ja rebenemine madalama sisepinge juures. See seletab ära, miks kõrgematel temperatuuridel oli vaja protsesside toimumiseks nõrgemat elektrivälja.

Selle nähtuse põhjuseks võib olla suurem aatomitevaheline vahekaugus, mis omakorda tähendab, et nad seovad üksteist nõrgemate jõududega. Seega piisab nendest jõududest jagu saamiseks madalamatest pingetest ning dislokatsioon ja rebenemine toimuvad kergemini.



Joonis 10 Atomaarse pinge jaotus emitteris temperatuuride 300 K ja 600 K juures hetkedel kui jõudu otsikule veel rakendatud (a, d), kui tekib dislokatsioon (b, e) ning vahetult enne emitteri rebenemist (c, f).

5.5 Ioniseeritud osakesed pinnal

Vaakumläbilöökide teooria põhjal on emitteri otsas osa aatomeid ioniseerunud elektronide lahkumise tulemusel. Käesolevas töös ei oldud arvestatud samalaenguliste ionide tõukumisega, mis võib samuti anda oma panuse nii rebenemise hetke kui ka asukoha suhtes. Kuid selle tööga on näidatud, et emitteri rebenemine toimub ka selle parameetriga arvestamata ning laengu juurde lisamine on tuleviku töö osa.

KOKKUVÕTE

Käesolevas töös eesmärk oli uurida kaldus emitteri mehaanilist käitumist elektrostaatilise jõu mõju all. Töö jooksul kasutati molekulaardünaamika meetodit.

Tööst tuli välja emitterisse dislokatsiooni tekkimiseks ning rebenemiseks vajaliku elektrostaatilise rõhu ning seega ka lokaalse elektrivälja nõrk negatiivne sõltuvus temperatuurist. Selle sõltuvuse olemasolu toetas ka atomaarse pinge analüüs, millest ilmnas, et kõrgetel temperatuuridel toimuvad dislokatsiooni tekke ja emitteri rebenemine madalama atomaarse pinge juures.

Samuti uuriti emitteri iseeneslikku võnkumist ja selle mõju dislokatsiooni tekkeks ning rebenemiseks vajalikule jõule. Tulemustest oli näha, et dislokatsioonid tekkisid parajasti siis kui emitter liikus pinnast eemale ning tema võnkumisest tingitud impulss andis oma panuse dislokatsiooni tekkesse. Võnkumised mõjutasid samuti dislokatsiooni tekke asukohta.

Simulatsioonidest saadud rebenemiseks vajalik elektriväli oli suurusjärgu võrra väiksem, kui mõned varasemastes uuringutes saadud väärtused. Ka selle põhjuseks võib tuua emitteri võnkumise.

Kuna enamus tulemusi, mis siit tööst saadi olid suurel määral mõjutatud kaldus emitteri võnkumisest, võiks järgmise sammuna uurida nende võnkumiste täpsemat mehaanikat ning ehk ka summutamisviise.

Tänuõnad

Südamest tänan minu juhendajaid Simon Vigonskit ja Kristian Kuppartit alatise abivalmiduse, kannatlikuse, huvitavate diskussioonide ning toetava suhtumise eest. Ma ei oleks osanud paremaid juhendajaid soovida.

Samuti tahan tänada kogu IMSi sõbralikku kollektiivi.

Tänu ka Maili Tirelile, eesti keele grammatika osas abi osutamise eest. Ilma temata oleks mu töös umbes suurusjärgu võrra rohkem komavigu.

KASUTATUD KIRJANDUS

1. Updated Baseline for a staged Compact Linear Collider, edited by P.N. Burrows, P. Lebrun, L. Linssen, D. Schulte, E. Sicking, S. Stapnes, M.A. Thomson, CERN-2016-004 (CERN, Geneva, 2016), <http://dx.doi.org/10.5170/CERN-2016-004>
2. Grudiev, A. & Wuensch, W. Design of the CLIC main linac accelerating structure for CLIC conceptual design report. (2010).
3. Wang, J. W. & Loew, G. A. Field emission and RF breakdown in high gradient room temperature linac structures. in Talk given at 768–794 (1997).
4. Descoeudres, A., Levinsen, Y., Calatroni, S., Taborelli, M. & Wuensch, W. Investigation of the dc vacuum breakdown mechanism. *Phys. Rev. Spec. Top. - Accel. Beams* **12**, (2009).
5. Nordlund, K. & Djurabekova, F. Defect model for the dependence of breakdown rate on external electric fields. *Phys. Rev. Spec. Top. - Accel. Beams* **15**, 071002 (2012).
6. Descoeudres, A., Ramsvik, T., Calatroni, S., Taborelli, M. & Wuensch, W. dc breakdown conditioning and breakdown rate of metals and metallic alloys under ultrahigh vacuum. *Phys. Rev. Spec. Top. - Accel. Beams* **12**, (2009).
7. Grudiev, A., Calatroni, S. & Wuensch, W. New local field quantity describing the high gradient limit of accelerating structures. *Phys. Rev. Spec. Top. - Accel. Beams* **12**, 102001 (2009).
8. Wuensch, W. et al. Statistics of vacuum breakdown in the high-gradient and low-rate regime. *Phys. Rev. Accel. Beams* **20**, 011007 (2017).
9. Griffiths, D. J. in *Introduction to Electrodynamics* 37–38 (Prentice Hall).

10. Djurabekova, F., Parviainen, S., Pohjonen, A. & Nordlund, K. Atomistic modeling of metal surfaces under electric fields: Direct coupling of electric fields to a molecular dynamics algorithm. *Phys. Rev. E* **83**, 026704 (2011).
11. Plimpton, S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *J. Comput. Phys.* **117**, 1–19 (1995).
12. Месяц, Г. А. & Баренгольц, С. А. Механизм генерации аномальных ионов вакуумной дуги. *Успехи Физических Наук* **172**, 1113–1129 (2002).
13. Месяц, Г. А. & Проскуровский, Д. И. Импульсный электрический разряд в вакууме. (Наука, 1984).
14. Fowler, R. H. & Nordheim, L. Electron emission in intense electric fields. in *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **119**, 173–181 (The Royal Society, 1928).
15. Timkó, H. & others. Modelling vacuum arcs: from plasma initiation to surface interactions. (2011).
16. Forbes, R. G. & Jensen, K. L. New results in the theory of Fowler–Nordheim plots and the modelling of hemi-ellipsoidal emitters. *Ultramicroscopy* **89**, 17–22 (2001).
17. Chatterton, P. A. A theoretical study of field emission initiated vacuum breakdown. *Proc. Phys. Soc.* **88**, 231 (1966).
18. Man, J., Obrtlík, K. & Polák, J. Extrusions and intrusions in fatigued metals. Part 1. State of the art and history. *Philos. Mag.* **89**, 1295–1336 (2009).

19. Man, J. et al. Extrusions and intrusions in fatigued metals. Part 2. AFM and EBSD study of the early growth of extrusions and intrusions in 316L steel fatigued at room temperature. *Philos. Mag.* **89**, 1337–1372 (2009).
20. Calatroni, S. et al. Breakdown Studies for the CLIC Accelerating Structures. (2010).
21. Vigonski, S., Djurabekova, F., Veske, M., Aabloo, A. & Zadin, V. Molecular dynamics simulations of near-surface Fe precipitates in Cu under high electric fields. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **23**, 025009 (2015).
22. Hull, D. & Bacon, D. J. Introduction to dislocations. (Elsevier/Butterworth-Heinemann, 2011).
23. Hirth, J. & Lothe, J. Theory of Dislocations. (John Wiley & Sons, 1982).
24. Thompson, A. P., Plimpton, S. J. & Mattson, W. General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions. *J. Chem. Phys.* **131**, 154107 (2009).
25. Lammmps'i dokumentatsioon, <http://lammmps.sandia.gov/doc/Manual.html> (Accessed: 25th May 2017) .
26. Resources: General, Atomic and Crystallographic Properties and Features of Copper. Available at: https://www.copper.org/resources/properties/atomic_properties.html. (Accessed: 24th May 2017)
27. Mises, R. v. Mechanik der festen Körper im plastisch- deformablen Zustand. *Math.-Phys. Kl.* 582–592 (1913).

28. Allen, M. P. Introduction to molecular dynamics simulation. *Comput. Soft Matter Synth. Polym. Proteins* **23**, 1–28 (2004).
29. Daw, M. S., Foiles, S. M. & Baskes, M. I. The embedded-atom method: a review of theory and applications. *Mater. Sci. Rep.* **9**, 251–310 (1993).
30. Tadmor, E. B. in *Modeling Materials: Continuum, Atomistic and Multiscale Techniques* (Cambridge University Press, 2011).
31. Hoover, W. G. Nose-Hoover nonequilibrium dynamics and statistical mechanics. *Mol. Simul.* **33**, 13–19 (2007).
32. Zhu, T., Li, J., Samanta, A., Leach, A. & Gall, K. Temperature and Strain-Rate Dependence of Surface Dislocation Nucleation. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 025502 (2008).
33. Ryu, S., Kang, K. & Cai, W. Predicting the dislocation nucleation rate as a function of temperature and stress. *J. Mater. Res.* **26**, 2335–2354 (2011).
34. Davey, W. P. Precision Measurements of the Lattice Constants of Twelve Common Metals. *Phys. Rev.* **25**, 753–761 (1925).
35. Strukowski, A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the Open Visualization Tool. *Model. Simul Mater Sci Eng* **18**, (2010).

Lihtlitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja lõputöö üldsusele kättesaadavaks tegemiseks

Mina, Viktoria Sorokina,

1. annan Tartu Ülikoolile tasuta loa (lihtlitsentsi) enda loodud teose „Vase pinnakareduste elektriväljast põhjustatud deformatsiooni uurimine molekulaardünaamika meetodiga“, mille juhendaja on Simon Vigonski,
 - 1.1. reprodutseerimiseks säilitamise ja üldsusele kättesaadavaks tegemise eesmärgil, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace-is lisamise eesmärgil kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni;
 - 1.2. üldsusele kättesaadavaks tegemiseks Tartu Ülikooli veebikeskkonna kaudu, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace'i kaudu kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni.
2. olen teadlik, et punktis 1 nimetatud õigused jäävad alles ka autorile.
3. kinnitan, et lihtlitsentsi andmisega ei rikuta teiste isikute intellektuaalomandi ega isikuandmete kaitse seadusest tulenevaid õigusi.

Tartu, **24.05.2017**